

Výpočet rozložení elektrického náboje na povrchu tělesa

Computation of charge distribution on the surface of a body

Barbora Chlebišová

Bakalářská práce

Vedoucí práce: doc. Ing. Dalibor Lukáš, Ph.D.

Ostrava, 2021

Abstrakt

Rozložení náboje na povrchu elektrody lze zjistit hledáním vázaného extrému funkce energie elektrostatického pole vzhledem k předepsané celkové hodnotě náboje. Tato úloha je odvozena z metody hraničních prvků. Povrch tělesa nabitého nábojem bude rozdělen do nepřekrývajících se geometrických prvků. Pomocí numerické kvadratury lze spočítat matici elektrostatických sil, jimiž prvky na sebe navzájem působí. Některé prvky obsahují nevlastní integrály, a to v případech, kdy v dané pozici mají společnou hranu, společný vrchol, nebo jsou navzájem identické. Cílem práce bude odstranění singularit v integrálech a jejich spočtení pomocí Gauss-Legendrovy kvadratury.

Klíčová slova

elektrostatika, vázané extrémy, numerická kvadratura, Legendrovy polynomy, Gauss-Legendrova kvadratura, nevlastní integrály, Duffyho substituce

Abstract

The Charge distribution on electrode surface can be determined by using the constraint extremum of the electrostatic field energy function. For this work, the total value of the charge was chosen. This problem is derived from the boundary element method. The surface of the charged body will be divided into geometrical elements which do not overlap. The matrix of electrostatic power, by which the elements affect mutually, can be calculated by the numerical quadrature. Some elements contain improper integrals, especially in cases, when they share a mutual edge or a vertex in a set position, or when they are identical. The aim of this work is the removal of singularities in integrals and their calculation by the Gauss-Legendre quadrature.

Keywords

electrostatics, constrained extremum, numerical quadrature, Legendre polynomials, Gauss-Legendre quadrature, improper integrals, Duffy transformation

Poděkování

Zejména bych chtěla poděkovat doc. Ing. Daliboru Lukášovi, PhD. za cenné rady, připomínky, velkou dávku trpělivosti a za čas, který byl ochoten věnovat této práci. Také děkuji rodině za podporu a pomoc během psaní. Velké díky také patří spolužákům a kamarádům za povzbuzování, opakované čtení práce a korekce textu.

Obsah

Seznam použitých symbolů a zkratk	5
1 Úvod	6
2 Základy elektrostatiky	7
2.1 Elektrický náboj	7
2.2 Elektrické pole a intenzita	8
2.3 Potenciální energie	8
2.4 Úloha rozložení náboje	9
3 Vázané extrém	10
3.1 Lokální extrém	10
3.2 Vázaný extrém	11
3.3 Úloha rozložení náboje	12
4 Metody numerické integrace	13
4.1 Newton-Cotesovy vzorce	14
4.2 Ortogonální polynomy	15
4.3 Gaussova kvadratura	16
4.4 Nevlastní integrály	18
4.5 Speciální techniky	19
4.6 Úloha rozložení náboje	22
5 Numerické řešení modelových úloh	23
5.1 Diskretizace	23
5.2 Rozložení elektrického náboje na disku	25
5.3 Numerické experimenty	34
6 Závěr	39
Literatura	41

Seznam použitých zkratek a symbolů

\mathbb{R}	– množina všech reálných čísel
D_f	– definiční obor funkce f
$\langle a, b \rangle$	– uzavřený interval od a do b
$ a $	– absolutní hodnota a
∇	– gradient
C^1	– prostor všech funkcí se spojitými prvními derivacemi řádu 1
\bar{b}	– vektor b
\bar{b}^T	– transponovaný vektor b

Kapitola 1

Úvod

Výpočet rozložení elektrického náboje na povrchu tělesa spočívá v minimalizaci energie elektrostatického pole. V této práci bude řešena úloha pro kontinuum nábojů, kde výpočet potenciální energie bude odvozen z Coulombova zákona. Cílem bude najít rozložení povrchového náboje q v objemu Ω . Uvažujeme tenké oblasti, např. plech kruhového tvaru. Úloha bude zjednodušena na výpočet rozložení náboje přes plochu Γ , která vede k nejjednodušší interpretaci metody hraničních prvků. Na jejím základě se plocha rozdělí do nepřekrývajících se geometrických prvků. Pro zjištění největší koncentrace náboje na ploše bude nutná minimalizace kvadratické funkce popisující elektrostatickou interakci prvků s rovnostním omezením na předepsaný celkový náboj. Úloha poté povede na úlohu vázaného extrému funkce a bude zapsána jako soustava lineárních rovnic. Jádrem práce bude odstranění singularit v minimalizované funkci, které se budou nacházet v prvcích na ploše Γ .

Text je rozdělen do čtyř kapitol. Nezbytné pojmy a vzorce pro pochopení fyzikální látky budou objasněny ve druhé kapitole. V ní bude také definována úloha rozložení náboje. Teoretické informace jsou dobře popsány ve zdrojích [1, 2, 3, 4]. Poté bude definován lokální extrém funkce více proměnných a z něj odvozený vázaný extrém. Ten bude použit pro zjištění nejvyššího výskytu náboje. Informace o extrémech lze najít v literatuře [5, 6, 7, 8]. Kapitola navazuje na problematiku numerické integrace. V této práci bude zejména využita Gauss-Legendrova kvadratura používající Legendrovy ortogonální polynomy. Jelikož vzorec pro výpočet energie obsahuje nevlastní integrál, bude i tomuto tématu věnován odstavec a následný postup pro řešení. Pro odstranění singularit je v této práci užita Duffyho substituce. Všechny údaje jsou napsány v materiálech [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20].

V praktické části práce bude zprvu odvozena úloha rozložení elektrického náboje na povrchu a její diskretizace. Úloha poté bude specifikována na konkrétní úlohu rozložení náboje na povrchu tenkostěnného disku. Hlavní úkol bude vyřešit jednotlivé integrály a rozdělit je na tři části: integrace mimodiagonálních prvků, integrace vedlejších diagonálních prvků a integrace diagonálních prvků. Po vyřešení singularit lze vše spočítat Gauss-Legendrovou kvadraturou. V závěru budou uvedeny numerické výsledky a jejich zdůvodnění.

Kapitola 2

Základy elektrostatiky

Pro řešení úlohy rozložení povrchového náboje je důležité nejprve upřesnit všechny pojmy z elektrostatiky, které se zde budou využívat. Nejdříve se tudíž zaměříme na elektrický náboj a jeho základní vlastnosti. Pomocí Coulombova zákona si definujeme elektrostatickou sílu, z té pak odvodíme definici a vzorec jak pro intenzitu, tak pro potenciál elektrického pole. V závěru této kapitoly získáme vzorce pro výpočet potenciální energie elektrostatického pole a rozebereme podrobněji úlohu rozložení náboje na objemu Ω .

Elektrostatika popisuje elektrické pole každého nabitého tělesa v jeho okolí. Jedná se o oblast, která se nemění a je v klidu. O bodovém náboji hovoříme jako o základní veličině elektrostatiky.

2.1 Elektrický náboj

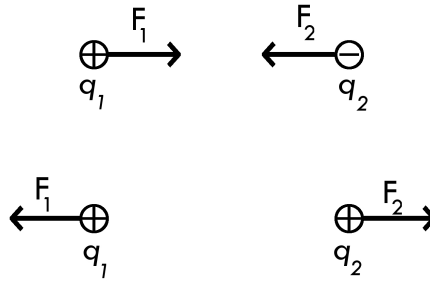
Elektrický náboj je fyzikální veličina s jednotkou Coulomb [C], kterou značíme písmenem q, Q . Všechny náboje nesou vždy celočíselný násobek $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ náboje elementárního, který má velikost přibližně $e \approx 1,602 \cdot 10^{-19} [C]$. Vidíme tedy, že platí vztah $q = n \cdot e$ a náboj nabývá buď kladných nebo záporných hodnot. Chování dvou opačných či stejných nábojů můžeme vidět na obrázku 2.1.

Vezměme dva bodové náboje, které mezi sebou interagují. Tyto náboje označme jako q_i, q_j ve vzdálenosti r . Tuto vzdálenost lze vyjádřit jako rozdíl poloh jednotlivých vektorů: $r = x_i - x_j$. Silové působení mezi těmito dvěma náboji umíme popsat Coulombovým zákonem

$$F_1 = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 |x_i - x_j|^2} \cdot e_{ij}, \quad (2.1)$$

kde $q_i, q_j \in \mathbb{R}$ jsou náboje, $x_i, x_j \in \mathbb{R}^3$, $x_i \neq x_j$ jsou polohy nábojů, ϵ_0 je permitivita vakua nabývající konstantní hodnoty přibližně $8,854 \cdot 10^{-12} [C^2 m^{-2} N^{-1}]$ a e_{ij} je jednotkový směrový vektor, který definujeme jako

$$e_{ij} := \frac{x_i - x_j}{|x_i - x_j|}.$$



Obrázek 2.1: Vzájemné působení dvou stejných a opačných nábojů.

Vektor e_{ij} míří od q_j k druhému náboji q_i a velikost síly $|F_{ij}| = |F_{ji}|$. Pro tyto síly platí zákon akce a reakce. V této kapitole je čerpáno ze zdrojů [1, 2, 3, 4].

2.2 Elektrické pole a intenzita

Fyzikální veličina E se nazývá intenzita elektrického pole a její jednotka je $[V \cdot m^{-1}]$. Intenzita $\mathbf{E}(x)$ je síla, kterou v určitém bodě x působí pole na jednotkový náboj $q = 1 [C]$.

Nyní si vezměme případ, kdy v \mathbb{R}^3 máme různě rozmístěné náboje splňující zákon superpozice sil. Hledejme rozložení náboje popsaného funkcí $\rho(y)$ v objemu $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Intenzitu elektrického pole funkce $\rho(x)$ pak definujeme jako

$$\mathbf{E}(\rho(x)) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\Omega} \frac{\rho(y)(x-y)}{|x-y|^3} dy. \quad (2.2)$$

Citace této kapitoly jsou [1, 4].

2.3 Potenciální energie

Potenciál je vzhledem k intenzitě definován jako vektorové pole závislé na souřadnicích bodů, ve kterých potenciál určujeme. Potenciálem rozumíme práci, kterou je třeba vykonat, pokud chceme převést elektrostatickou sílu z jednoho místa na druhé s nulovým potenciálem. Značka potenciálu je φ a jednotka je volt $[V]$. Elektrický potenciál definujeme jako

$$\mathbf{E}(x) = -\nabla\varphi(x), \quad (2.3)$$

kde $\varphi(x) \rightarrow 0$ pro $\|x\| \rightarrow \infty$.

Vzorec elektrického potenciálu pro shluky nábojů dané hustotou ρ vyjádříme takto:

$$\varphi(x) := \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\Omega} \frac{\rho(y)}{|x-y|} dy. \quad (2.4)$$

Potenciální energii elektrického pole pak značíme W a funkci definujeme jako

$$W(\rho(x)) := \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} dS(y)dS(x). \quad (2.5)$$

V této kapitole je citováno z [1, 2, 3, 4].

2.4 Úloha rozložení náboje

V této kapitole se seznámíme s úlohou rozložení náboje podrobněji. Máme dán objem Ω , jenž je pokryt nábojem $Q > 0$. Chceme spočítat rozložení povrchového náboje ρ na objemu Ω . Definujme si úlohu takto:

$$\begin{cases} \text{Hledáme funkci náboje } \rho \in \Theta := \{\rho : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\Omega} \rho = Q\} \\ W(\rho) \leq W(\tau), \text{ pro } \forall \tau \in \Theta, \end{cases} \quad (2.6)$$

kde W je potenciální energie elektrostatického pole (2.5). Při počítání náboje minimalizujeme energii elektrostatického pole. Když tedy počítáme potenciální energii W mračna nábojů ze vzorce (2.5), vidíme, že ϵ_0 nemá na minimalizaci vliv a můžeme jej z funkce vypustit. Minimalizace bude podrobněji popsána v kapitole 5.1. Pokud tedy platí, že neexistuje menší funkce než ρ , pak splňujeme všechny podmínky pro nalezení rozložení náboje.

Jedná se o nejjednodušší interpretaci metody hraničních prvků, na jejímž základě si v pozdější kapitole 5.1 tenkostěnnou oblast Ω zjednodušíme tak, že budeme předpokládat konstantní hustotu náboje přes výšku a zanedbáme rozložení náboje v jeho tloušťce. Poté Ω přepíšeme na plochu Γ , kterou si rozdělíme do nepřekrývajících se trojúhelníků:

$$\begin{aligned} W(\rho(x)) &:= \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} dS(y)dS(x) \approx \\ &\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_0^t \int_{\Gamma} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} dS(x,y)dS \Gamma \approx \\ &\frac{t}{4\pi\epsilon_0} \int_{\Gamma} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} dS(x,y), \end{aligned}$$

kde t je konstantní tloušťka objemu Ω .

Kapitola 3

Vázané extrémy

Pro výpočet rozložení elektrického náboje na povrchu tělesa je nutné znát problematiku vázaného extrému. Dřív, než vyřešíme naši úlohu, definujeme si lokální extrémy funkcí více proměnných, vázaný extrém a jeho použití.

3.1 Lokální extrémy

Hledání lokálních extrémů jsou v matematice a různých dalších odvětvích důležité a velmi časté úlohy.

Definice 1 Řekneme, že funkce $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ má v bodě $c \in \mathbb{R}^n$ lokální maximum (resp. ostré lokální maximum), existuje-li $\delta > 0$ takové, že pro $\forall x \in P(c, \delta) = \{x \in \mathbb{R}^n : 0 < \|x - c\| < \delta\}$ platí

$$f(x) \leq f(c) \quad (\text{resp. } f(x) < f(c)).$$

Nahradíme-li nerovnosti $f(x) \leq f(c)$ ($f(x) < f(c)$) nerovnostmi $f(x) \geq f(c)$ ($f(x) > f(c)$), dostaneme definici lokálního minima a ostrého lokálního minima.

Pokud bychom měli funkci f definovanou přímo na množině $A \subset \mathbb{R}^n$ a $c \in A$, pak by každý bod x musel patřit do okolí $P(c, \delta) \cap A$.

Věta 1 *Nutná podmínka existence lokálního extrému*

Nechť funkce $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ má v bodě $c \in \mathbb{R}^n$ lokální extrém a necht existuje $\frac{df(c)}{du}$, ($u \in \mathbb{R}^n, \|u\| = 1$). Pak

$$\frac{df(c)}{du} = 0.$$

Pokud je navíc funkce f v bodě c diferencovatelná, pak gradient nabývá hodnot

$$\nabla f(c) = (0, 0, \dots, 0)$$

a bodu c říkáme *stacionární bod funkce f* .

Pro ostrý lokální extrém platí stejná definice, změní se akorát nerovnost na ostrou. Stejně by se definovala funkce na uzavřené množině. Tato množina M by byla definičním oborem D_f funkce f .

Věta 2 Postačující podmínka existence lokálního extrému

Nechť funkce $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ má v bodě $c \in \mathbb{R}^n$ spojité všechny parciální derivace druhého řádu a nechť c je stacionárním bodem f . Pak platí:

1. Je-li kvadratická forma $d^2 f_c$ **pozitivně definitní**, má f v bodě c ostré lokální minimum.
2. Je-li kvadratická forma $d^2 f_c$ **negativně definitní**, má f v bodě c ostré lokální maximum.
3. Je-li kvadratická forma $d^2 f_c$ **indefinitní**, nemá f v bodě c lokální extrém.

$d^2 f_c$ je druhá derivace funkce f v bodě c a rozumíme jí matici $d^2 f(c) = (\frac{\partial^2 f(c)}{\partial x_i \partial x_j})$, kterou nazýváme *hessián*. Zdroje této kapitoly jsou [5, 6].

3.2 Vázaný extrém

V této části práce se budeme zabývat extrémy vázané na podmínky popsanými rovnostmi. Zaměříme se na vázané extrémy definované soustavou rovnic ve tvaru

$$g_1(x_1, \dots, x_n) = 0,$$

$$\vdots$$

$$g_m(x_1, \dots, x_n) = 0.$$

Rovnice $g_i(x)$ se nazývají *vazebné podmínky* a $x \in P$ (množina P je často \mathbb{R}^n). Pokud máme potřebné parciální derivace funkce f, g_i na otevřené množině P , pak umíme najít maximum (minimum) funkce f na množině $X = \{x \in P : g_i(x) = 0, i = 1, \dots, m\}$. Existují různá řešení vázaných extrémů. Nejjednodušší případ je, pokud jde vyjádřit některé proměnné ze zadaných vazebných podmínek. Poté už stačí dosadit získaná vyjádření zpět do funkce f a převést danou úlohu na hledání lokálních extrémů podle definice 1. Ve většině případů však neumíme úlohu explicitně řešit. Na tento případ ovšem existují různé metody mající základ na větě o implicitní funkci, díky kterým umíme extrém najít. My se seznámíme s nejpoužívanější metodou: Lagrangeovou. Platí tato věta:

Věta 3 Buď dána funkce $f : \mathbb{R}^n \supseteq D_f \rightarrow \mathbb{R}$ a nechť funkce $g_1(x_1, \dots, x_n), \dots, g_m(x_1, \dots, x_n)$, ($m < n$) jsou třídy C^1 . Definujme funkci Φ

$$\Phi(x_1, \dots, x_n, \lambda_1, \dots, \lambda_m) = f(x_1, \dots, x_n) + \sum_{j=1}^m \lambda_j g_j(x_1, \dots, x_n),$$

kde $\lambda_j \in \mathbb{R}, j = 1, \dots, m$, je řešení soustavy rovnic

$$\frac{\partial \Phi(x_1, \dots, x_m)}{\partial x_i} = 0, i = 1, \dots, n$$

$$g_j(x_1, \dots, x_n) = 0, j = 1, \dots, m.$$

Má-li funkce Φ ve svém stacionárním bodě extrém, pak i funkce f má v tomto bodě vázaný lokální extrém na podmínky $g_j(x_1, \dots, x_n) = 0$.

K hledání vázaného extrému funkce můžeme použít předchozí větu, která se nazývá *Lagrangeova metoda*. Lagrangeovou funkcí pak rozumíme funkci Φ a λ je reálné číslo, které se nazývá Lagrangeovský multiplikátor. Tato kapitola je čerpána ze zdrojů [5, 7, 8].

3.3 Úloha rozložení náboje

Úlohu vázaného extrému v naší problematice využijeme při počítání rozložení náboje pomocí Lagrangeovy metody. V pozdější kapitole 5.1 dostaneme náboj $\rho(x) \approx \bar{\rho} \in \mathbb{R}^n$, který povede k minimalizaci úlohy

$$W(\bar{\rho}) = \frac{1}{2} \bar{\rho}^T \mathbb{V} \bar{\rho}$$

a náboj Q získáme sumou $Q = \sum_{i=1}^n \bar{b}_i \rho_i$. Minimalizační podmínky úlohy rozložení náboje vycházející ze vzorce (2.6) spočteme pomocí soustavy lineárních rovnic

$$\begin{bmatrix} \mathbb{V}, & \bar{b} \\ \bar{b}^T, & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\rho} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ Q \end{bmatrix},$$

kde vektor \bar{b} bude obsah právě jedné části počítané plochy. Odvození této soustavy si podrobněji rozebereme v kapitole 5.1.

Kapitola 4

Metody numerické integrace

Již jsme si definovali výpočet energie elektrostatického pole jako (2.5). Jeho řešení však nebude úplně triviální. Jelikož je odvozený integrál nevlastní, bude potřeba numerické integrace pro získání výsledku. V této kapitole si uvedeme základní principy numerické integrace a také i přesný výpočet pomocí Gauss-Legendrovy kvadratury. Specifikujeme si nevlastní integrály a v závěru použijeme Duffyho substituci pro odstranění singularit v zadané funkci.

Pokud potřebujeme nalézt hodnotu určitého integrálu, který však nelze analytickými metodami spočítat, či je jeho analytický výpočet příliš pracný, pak zadaný integrál počítáme numericky. Podívejme se na přibližný výpočet integrálu funkce f na intervalu $\langle a, b \rangle$

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx. \quad (4.1)$$

Z geometrického významu Riemannova integrálu lze usoudit, že budeme počítat velikost plochy, která je vymezená grafem zadané funkce f . Při vhodném zvolení interpolačního polynomu a jeho uzlů získáme přesnější aproximaci a celkový výpočet. Tento odstavec obsahuje zdroje [10, 11, 12, 13].

Existuje více způsobů numerické kvadratury. Nejjednodušší metodu dostaneme integrací Lagrangeova interpolačního polynomu, kde uzly interpolace bereme ekvidistantně. Tyto výpočty jsou známy jako *Newton-Cotesovy vzorce*. Jelikož se jedná pouze o přibližný výpočet, lze zjistit také chybu numerické integrace, kterou vypočítáme jako rozdíl $R(f) = I(f) - I(\varphi)$.

4.1 Newton-Cotesovy vzorce

Vezměme funkci f a nahraďme ji interpolačním polynomem $f(x) \approx \varphi_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot L_i(x)$, kde $L_i(x)$ je Lagrangeův interpolační polynom:

$$L_i(x) = \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Přibližný výpočet pro nahrazenou funkci bude vypadat

$$I(n) = \sum_{i=0}^n \omega_i \cdot f(x_i), \quad (4.2)$$

kde ω_i jsou integrační váhy zvolené interpolace pro které platí

$$\omega_i := \int_a^b L_i(x) dx, i = 0, 1, \dots, n$$

a $x_0, x_1, \dots, x_n, x_i \neq x_j$ pro $i \neq j$ jsou integrační body, též nazývané jako integrační uzly kvadraturní formule.

Odvodili jsme si obecnou Newton-Cotesovu kvadraturu, která má konstantní vzdálenost integračních bodů a stupeň polynomu je $n \geq 1$. Následně provedeme rozbor základních druhů pravidel vztupně podle n a uvedeme jejich početní vzorec. Jedná se o obdélníkové pravidlo, lichoběžníkové pravidlo a Simpsonovo pravidlo.

4.1.1 Obdélníkové pravidlo

Položme stupeň polynomu $n = 0$. Integrační bod nabývá hodnoty $x_0 = \frac{a+b}{2}$ a konstantní funkce má tvar $f(\frac{a+b}{2})$. Pak odpovídající vzorec má podobu

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b f\left(\frac{a+b}{2}\right) dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right). \quad (4.3)$$

4.1.2 Lichoběžníkové pravidlo

V tomto případě bude $n = 1$. Aproximovaná funkce bude procházet dvěma body $x_0 = a, x_1 = b$: $f(x) \approx f(a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a) = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$. Z toho dostáváme vzorec pro výpočet integrálu

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)). \quad (4.4)$$

4.1.3 Simpsonovo pravidlo

Pro interpolační polynom procházející třemi body zvolme $n = 2$. Dostáváme tři interpolační body $x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}, x_2 = b$. Vzorec pro výpočet integrálu bude vypadat

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right). \quad (4.5)$$

Víme, že pro každý odvozený vzorec existuje chyba, které jsme se v počítání dopustili. Abychom tuto chybu minimalizovali a dostali přesnější výsledky, lze použít složené vzorce. Pokud si rozdělíme interval $\langle a, b \rangle$ na menší dílky $h = \frac{b-a}{n}, n \geq 2$ stejné délky, můžeme na každém zvlášť použít jedno z integračních pravidel. Ve výpočtu ekvidistantně rozdělíme uzly $x_i = a + i \cdot h$. Při sečtení všech výsledků dostáváme odpovídající pravidlo ve složené podobě. Obecný integrál složeného vzorce rozložíme takto:

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx, \quad (4.6)$$

kde $i = 0, \dots, n$. V této kapitole bylo užito zdrojů [10, 11, 12, 13].

4.2 Ortogonální polynomy

V této kapitole si nadefinujeme ortogonální polynomy, které později využijeme při odvození Gaussovy kvadratury.

Definice 2 *Nechť je dán vektorový prostor ϕ se skalárním součinem $(f, g), f, g \in \phi$. Říkáme, že množina $\varphi_0, \dots, \varphi_b \subset \phi$ je ortogonální, jestliže*

$$(\varphi_i, \varphi_j) \begin{cases} = 0 & \text{pro } i \neq j \\ \neq 0 & \text{pro } i = j \end{cases}$$

Pomocí Gramm-Schmidtova ortogonalizačního algoritmu sestrojme ortogonální bázi splňující tříčlennou rekurenci vzhledem ke skalárnímu součinu. Ten umíme na prostoru $L_\omega^2(\langle a, b \rangle) \in C(\langle a, b \rangle, \mathbb{R}^+)$ zobecnit na vzorec

$$(f, g) := \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx, \quad (4.7)$$

kde $\omega(x)$ je váhová funkce.

Uvedme si pro příklad dva základní druhy ortogonálních polynomů: Čebyševovy polynomy a Legendrovy polynomy.

4.2.1 Čebyševovy polynomy

Mějme Čebyševovy polynomy ve tvaru

$$T_0(x) = 1,$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x).$$

Tyto polynomy tvoří ortogonální systém vzhledem ke skalárnímu součinu

$$(f, g) = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)g(x)dx, \quad (4.8)$$

kde $\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$.

4.2.2 Legendrov polynomy

Nechť Legendrov polynomy jsou zadány jako

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1} \cdot x \cdot P_k(x) - \frac{k}{k+1} \cdot P_{k-1}(x).$$

Pak jsou tyto polynomy ortogonální vzhledem ke skalárnímu součinu

$$(f, g) = \int_{-1}^1 f(x)g(x)dx, \quad (4.9)$$

kde $\omega(x) = 1$.

Všechny kořeny ortogonálních polynomů jsou reálné, navzájem různé a všechny leží v daném intervalu. Kapitola byla sepsána pomocí literatury [9, 12, 13].

4.3 Gaussova kvadratura

Již jsme se dozvěděli, že chybu numerické integrace umíme zmenšit vhodně zvoleným rozložením uzlů interpolace. V této kapitole budeme řešit přibližnou hodnotu integrálu funkce, ve kterém zvolíme ortogonální systém polynomů a jehož uzly budou kořeny ortogonálních polynomů.

Definice 3 *Kvadrurní formule, jejichž uzly jsou vybrány jako kořeny L_ω^2 ortogonálních polynomů, se nazývají **Gaussovy kvadrurní formule**.*

Věta 4 Necht Q_j , $j = 0, 1, \dots$ je soustava ortogonálních polynomů na intervalu $\langle a, b \rangle$ s volbou $\omega(x) = 1$. Necht x_i , $i = 0, 1, \dots, n$ jsou kořeny polynomu Q_{n+1} . Sestrojme Gaussův kvadrurní vzorec

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \varphi(x)dx = \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)dx, \quad (4.10)$$

kde ω_i vypočítáme jako

$$\int_a^b L_i(x)dx.$$

Pak pro každý polynom $p_{2n+1} \in P_{2n+1}$ stupně $2n+1$ platí

$$\int_a^b p_{2n+1}(x)dx = \sum_{i=0}^n \omega_i p_{2n+1}(x_i).$$

Věta 5 Mějme interval $\langle a, b \rangle \subset \mathbb{R}$ a váhovou funkci $\omega(x)$. Systém ortogonálních polynomů $\langle u_n \rangle_{n \in \mathbb{N}_0}$. Pak $u_n(x)$ má v intervalu $\langle a, b \rangle$ **různých** reálných kořenů.

Oproti Newtonových-Cotesových vzorců si můžeme povšimnout, že pomocí Gaussovy kvadratury umíme přesně integrovat i polynomy vyššího stupně než n . I u Gaussovy kvadratury rozlišujeme různé druhy formulí. Seznámíme se jak s Gauss-Čebyševovou, tak hlavně s Gauss-Legendrovou aproximací.

4.3.1 Gauss-Čebyševova kvadratura

Máme-li zadanou integraci typu: $\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)dx$, pak se používá kvadratura Gauss-Čebyševova.

Polynomy jsou ortogonální vzhledem ke skalárnímu součinu $\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)g(x)dx$ a jeho kořeny jsou rozloženy na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$. Kořeny $(n+1)$ -ho polynomu a váhy spočteme jako

$$x_i = \cos \left(\frac{\pi \cdot (2i+1)}{2 \cdot (n+1)} \right), \quad i = 0, \dots, n$$

$$\omega_i = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \cdot L_i(x)dx = \frac{\pi}{n+1},$$

kde n je stupeň kvadrurní proměnné. Pak dostáváme vzorec pro výpočet Gauss-Čebyševovy kvadratury ve znění

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot \omega_i. \quad (4.11)$$

4.3.2 Gauss-Legendrova kvadratura

Pokud máme uzly tvořeny kořeny Legendrových polynomů (z kapitoly 4.2.2) stupně n a váhová funkce je $\omega(x) = 1$, pak mluvíme o Gauss-Legendrovém kvadraturním vzorci, který je ortogonální vzhledem ke skalárnímu součinu $\int_{-1}^1 f(x)g(x) dx$. Musí přitom platit, že daná funkce f je analytická a leží na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$. Pak dostáváme výslednou formuli ve tvaru

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot \omega_i dx, \quad (4.12)$$

kde $x_i, i = 0, \dots, n$ jsou uzly kvadratické formule a ω_i jsou její váhy, které spočítáme jako

$$\omega_i = \int_{-1}^1 L_i(x) dx, \quad L_i(x) = \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Máme-li zadaný interval s jiným rozmezím než $\langle -1, 1 \rangle$, musíme v tomto intervalu přetransformovat všechny uzly a váhy. Mějme tedy zadaný interval $\langle a, b \rangle$. Pak jeho uzly vypočítáme pomocí vzorce

$$x_i^{\langle a, b \rangle} = \frac{(b - a)x_i^{\langle -1, 1 \rangle} + b + a}{2} \quad (4.13)$$

a jeho váhy pak spočteme jako

$$\omega_i^{\langle a, b \rangle} = \frac{a}{b} \cdot \omega_i^{\langle -1, 1 \rangle}. \quad (4.14)$$

V této práci budeme pro výpočty používat Gauss-Legendrovu kvadraturu. Citace této kapitoly jsou [14, 12, 13, 9].

4.4 Nevlastní integrály

U určitého integrálu je nutné, aby byla funkce na daném intervalu ohraničená (omezená) a aby se nacházela na uzavřeném intervalu $\langle a, b \rangle$. Pokud máme integrál, který alespoň jednu podmínku nesplňuje, nazýváme jej *nevlastní integrál*. Podle typu singularity zvolíme vhodnou kvadraturu, která nevlastní integrál vyřeší. U těchto integrálů rozlišujeme dva typy případů:

1. Nevlastní integrál leží na neuzavřeném intervalu.
2. Nevlastní integrál má funkci v intervalu $\langle a, b \rangle$ nespojitou.

4.4.1 Nevlastní integrál na neohraničeném intervalu

V tomto případě máme zadanou funkci $f(x)$ na intervalu $\langle a, \infty \rangle$, $a \in \mathbb{R}$. Tento případ však v našem výpočtu nebude obsažen, proto jej nebudeme dále rozebírat.

4.4.2 Nevlastní integrál nespojité funkce

Na zprava uzavřeném intervalu $\langle a, b \rangle$, $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$ máme definovanou funkci $f(x)$. Ta má však hodnotu $\lim_{x \rightarrow b} f(x) = \infty$ a integrál je v tomto bodě nevlastní. V našem případě vyřešíme nevlastní integrál rozdělený na dílčí intervaly $\langle -a_1, b_1 \rangle$ Gaussovou kvadraturou. Hodnoty a_1, b_1 přitom vybíráme tak, aby pro dostatečně malou konstantu ϵ a pro $\forall x \in \mathbb{R}$, $\langle -a_1, b_1 \rangle$ platilo

$$f(x) < \epsilon.$$

V jiných případech je nutné zjistit, jaký typ singularity je ve funkci obsažen a podle něj pak vybrat vhodnou kvadraturu. Pokud bude splněna konvergence ve všech dílčích integrálech, pak i původní integrál bude konvergentní. V této kapitole bylo čerpáno z [15, 16, 17]

Pakliže tedy máme nevlastní integrál, je nutné vyřešit jeho singularity speciálními metodami, abychom se jich zbavili a integrál bylo možné spočítat.

4.5 Speciální techniky

Pro řešení integrálů, které obsahují singularity v určitých bodech, je důležité, aby se tato singularita odstranila a bylo tak možno dosáhnout co nejpřesnějšího výsledku numerické kvadratury. V mnoha případech je řešení problematické, zejména u vícerozměrných integrálů. V této práci bude využita metoda Duffyho substituce, která odstraní singularity v integrační oblasti, např. ve čtverci nebo v krychli. Jedná se o velice používanou techniku eliminování singularit ve funkcích.

4.5.1 Duffyho substituce

Metoda Duffyho transformace spočívá v přesunutí části plochy na jednotkový čtverec, který odstraňuje singularity, které se nacházejí ve funkci. V nejjednodušším případě se integrál v podobě trojúhelníku transformuje do funkce na jednotkovém čtverci, kde je již singularita odstraněna. Literatura je ze zdrojů [18, 19, 20].

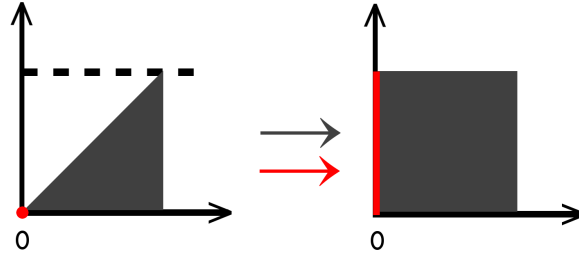
4.5.2 Duffyho substituce pro trojúhelník

Pro správné pochopení této problematiky si ukážeme příklad.

Příklad 1

Mějme zadanou funkci $f : \langle 0, 1 \rangle \times \langle 0, 1 \rangle \rightarrow \mathbb{R}$, která má singularity v $(0,0)$. Pro výpočet použijeme integrál

$$I = \int_0^1 \int_0^x f(x, y) dy dx$$



Obrázek 4.1: Duffyho transformace – singularita v rohu.

a Duffyho substituci

$$y = \eta \cdot x, \quad dy = x \cdot d\eta$$

$$y = 0 \Leftrightarrow \eta = 0 \quad y = x \Leftrightarrow \eta = 1,$$

kde výsledný integrál vypočítáme jako

$$I = \int_0^1 \int_0^1 f(x, \eta x) d\eta dx.$$

Přičemž singularita, která se nacházela v rohu čtverce, byla přesunuta po celé straně, jak můžeme vidět na obrázku 4.5.1. Vezměme tedy funkci $f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}$. Použijeme transformaci a dostaneme integrál

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \frac{1x}{\sqrt{x^2 + \eta^2 x^2}} d\eta dx = \int_0^1 \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{1 + \eta^2}} d\eta dx,$$

kde $\sqrt{1 + \eta^2}$ je už pěkná funkce, která lze integrovat. ■

Hlavní myšlenkou Duffyho substituce je odstranit singularty díky Jacobiánu. Z obrázku 4.1 vidíme, že transformace probíhá z trojúhelníku na čtverec. Po zavedení substituce již můžeme pozorovat, že změněná funkce je dostatečně hladká a může být integrována pomocí Gaussovy kvadratury.

4.5.3 Singularita ve vrcholu - pyramidy

Mějme integrál funkce $f(x, y, z)$ ve 3D prostoru nad pyramidou s vrcholy v bodech $(0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$, $(1, 1, 0)$, $(1, 0, 1)$, $(1, 1, 1)$. Tento integrál lze zapsat ve tvaru

$$I = \int_0^1 \int_0^x \int_0^x f(x, y, z) dz dy dx. \quad (4.15)$$

Zavedme jednoduchou substituci

$$\text{Sub: } y = xu, \quad \text{Sub: } z = xw$$

a transformovaný integrál nabývá podoby

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 x^2 f(x, xu, xw) dw du dx, \quad (4.16)$$

kde $x^2 f(x, xu, xw)$ je nyní analytická funkce. Tato funkce by již měla jít numericky integrovat a neobsahuje žádnou singularitu.

4.5.4 Singularita v rohu - krychle

Pro jednoduchost vysvětlení uvažujme krychli se singularitou v bodě $(0, 0, 0)$. Chceme vyřešit integrál

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 F(x, y, z) dz dy dx. \quad (4.17)$$

Rozdělme krychli na tři různé části

$$0 \leq x \leq 1, \quad x > y, \quad x > z, \quad 0 \leq y \leq 1 \quad y > z, \quad y > x \quad 0 \leq z \leq 1, \quad z > x, \quad z > y.$$

Z každé oblasti je teď čtvercová pyramida, která má základnu vždy jednu ze tří protilehlých ploch. Teď po rozdělení můžeme nově napsat výpočet (4.17) do tří integrálů

$$I = \int_0^1 \int_0^x \int_0^x F(x, y, z) dz dy dx + \int_0^1 \int_0^y \int_0^y F(x, y, z) dx dz dy + \int_0^1 \int_0^z \int_0^z F(x, y, z) dy dx dz, \quad (4.18)$$

kde funkci f lze zapsat jako

$$f(x, y, z) = F(x, y, z) + F(y, z, x) + F(z, x, y).$$

Každý z nich pak lze transformovat přes krychli technikou popsané v kapitole 4.5.3. V těchto kapitolách je obsah literatury z [19, 20]. Pro lepší pochopení této problematiky uvedme ještě jeden příklad.

Příklad 2

Vezměme teď v úvahu, že jednotkový čtverec budeme muset rozdělit na dva trojúhelníky. I v tomto

případě jde použít Duffyho substituce, je nutné ji však aplikovat dvakrát (pro každý integrál).

$$I = \int_0^1 \int_0^1 f(x, y) dy dx = \int_0^1 \int_0^x f(x, y) dy dx + \int_0^1 \int_0^y f(x, y) dx dy$$

Nyní použijeme Duffyho transformaci:

$$I = \int_0^1 \int_0^1 x \cdot f(x, \eta x) d\eta dx + \int_0^1 \int_0^1 y \cdot f(\eta y, y) d\eta dy.$$

Abychom sjednotili tvar funkcí, přidáme ještě dvě substituce pro každý integrál: 1) $x = \xi$ 2) $y = \xi$.

Pak dostaneme konečný integrál pro výpočet ve tvaru

$$I = \int_0^1 \int_0^1 f(x, y) = \int_0^1 \int_0^1 \xi (f(\xi, \xi\eta) + f(\eta\xi, \xi)) d\eta d\xi.$$

I v tomto příkladě vezměme pro ilustraci funkci $f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}}$. Po použití Duffyho dostaneme

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \xi \left(\frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2 \xi^2}} + \frac{1}{\sqrt{\eta^2 \xi^2 + \xi^2}} \right) = \int_0^1 \int_0^1 \frac{2}{\sqrt{1 + \eta^2}}.$$

■

4.6 Úloha rozložení náboje

Nabyté vědomosti této kapitoly uplatníme zejména při sestavování symetrické pozitivně definitní matice \mathbb{V} . Tu si definujeme v kapitole 5.1. Výpočet této matice bude obsahovat integrály, v nichž bude obsažena singularita, kterou odstraníme použitím Duffyho substituce. V našem případě budeme eliminovat singularity typu $\frac{1}{r}$. Jelikož rozdělíme plochu Γ na trojúhelníky se singularitou v r , budeme transformaci aplikovat na každý integrál.

Kapitola 5

Numerické řešení modelových úloh

V kapitole 2.6 jsme si uvedli úlohu rozložení náboje. V této kapitole si tuto úlohu zjednodušíme a poté vypočítáme rozložení elektrostatického náboje na disku. Uvedeme si praktické příklady a numerické výsledky pro různé hodnoty.

5.1 Diskretizace

Rozdělme si plochu Γ na trojúhelníky

$$\Gamma = \cup_{i=1}^n T_i.$$

Mějme přitom na paměti, že průnik T_i a T_j je nenulový pro každé $i \neq j$. Tyto trojúhelníky pak mohou mít:

1. společnou právě jednu hranu: $\overline{T_i} \cap \overline{T_j}$
2. společný právě jeden vrchol: $\overline{T_i} \cap T_j$
3. jsou totožné: $T_i = T_j$

Hledejme novou funkci $\bar{\rho} \in \mathbb{R}^n \leftrightarrow \bar{\rho}(x) = \bar{\rho}_i$, $x \in T_i$ takovou, že pro ni platí $\rho(x) \approx (\bar{\rho})_i$, pro každé $x \in T_i$. Dostáváme tedy novou funkci, díky které máme úlohu rozdělenou na trojúhelníky a umíme ze vzorce (2.5) spočítat potenciální energii elektrostatického pole jako

$$W(\bar{\rho}) = \frac{1}{4\pi} \cdot \sum_{i=1}^n \int_{T_i} \sum_{j=1}^n \int_{T_j} \frac{\rho_i \rho_j}{|x-y|} dS(y) dS(x). \quad (5.1)$$

Hledáme-li minimalizaci kvadratické formy n -proměnných, pak ji můžeme zapsat pomocí složek jako $K(x) = ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2$, nebo tuto formu lze vypočítat v maticovém tvaru jako

$$\frac{1}{2} \cdot x^T \cdot \mathbb{V} \cdot x, \quad (5.2)$$

kde x je vektor a \mathbb{V} je reálná čtvercová matice. V tomto odstavci je použit zdroj [16].

V našem případě máme potenciální energii, kterou v kvadratické formě zapíšeme $W(\rho) = \frac{1}{2}\rho^2$. Z toho již vidíme, že potenciální energii elektrostatického pole dostaneme maticově ve tvaru

$$W(\bar{\rho}) := \frac{1}{2} \cdot (\bar{\rho})^T \cdot \mathbb{V} \cdot \bar{\rho}. \quad (5.3)$$

kde $\bar{\rho} \in \mathbb{R}^n$ a \mathbb{V} je symetrická pozitivní matice o velikosti $n \times n$. Ověříme si výpočet matice \mathbb{V} :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \cdot x^T \cdot \mathbb{V} \cdot x &= \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \frac{\rho(x)\rho(y)}{4\pi|x-y|} dS(y) dS(x) = \\ &= \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^n \int_{T_i} \rho_i \sum_{j=1}^n \int_{T_j} \rho_j \frac{1}{4\pi|x-y|} dS(y) dS(x) = \frac{1}{2} \cdot x^T \cdot \mathbb{V} \cdot x, \end{aligned}$$

kde tedy matici vypočítáme jako

$$\mathbb{V}_{ij} = \int_{T_i} \int_{T_j} \frac{1}{4\pi|x-y|} dS(y) dS(x). \quad (5.4)$$

Ze vzorce (5.1) lze odvodit, že

$$\int_{T_i} dS(x)$$

je obsah jednoho trojúhelníku T_i . Celkový obsah plochy pak vypočítáme jako

$$\sum_{i=1}^n \int_{T_i} dS(x) \cdot \rho_i.$$

Pak tedy pro ρ_i platí vztah

$$\sum_{i=1}^n \rho_i = Q \cdot \frac{n}{\text{obsah}(\Gamma)}, \quad (5.5)$$

který určuje obsah plochy Γ a $\sum_{i=1}^n \rho_i$ je lineární funkce.

Mějme kvadratickou funkci n -proměnných s lineárním omezením. Vezměme minimalizovanou funkci (5.3) a funkci $\bar{b}^T \cdot \bar{\rho} = Q$, kde vektor

$$\bar{b}^T = (|\Gamma_1|, |\Gamma_2|, \dots, |\Gamma_n|) \quad (5.6)$$

je obsah jednotlivých částí počítané plochy. Jestliže matice \mathbb{V} je symetrická, pozitivně definitní matice, pak úloha vede na úlohu hledání vázaného extrému (popsanou v kapitole 3.2) a lze ji zapsat

jako soustavu lineárních rovnic

$$\begin{bmatrix} \mathbb{V}, & \bar{b} \\ \bar{b}^T, & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\rho} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ Q \end{bmatrix}, \quad (5.7)$$

kde λ je Lagrangeovský multiplikátor. Odvoďme si ještě pro pochopení vektor \bar{b} :

$$\begin{aligned} \bar{b}^T \bar{\rho} &= \int_{\Gamma} \rho(x) dS(x) = \\ &= \sum_{i=1}^n \rho_i \int_{\Gamma} dS(x) = (|\Gamma_1|, |\Gamma_2|, \dots, |\Gamma_n|) \cdot \bar{q} = \bar{b}^T \bar{\rho}. \end{aligned}$$

Máme tedy definovanou úlohu rozložení elektrického náboje na povrchu tělesa. Jádrem úlohy pak bude odstranění singularit v matici \mathbb{V} , které se budou nacházet v trojúhelnících T_i, T_j . Budeme brát v potaz dva případy integrálu:

- integrál bez singularit, kde se trojúhelníky vůbec nedotýkají
- nevlastní integrál, kde trojúhelníky mají společnou hranu či vrchol

5.2 Rozložení elektrického náboje na disku

V kapitole 2.6 jsme si definovali objem Ω , který v našem příkladě bude disk. Předpokládejme, že náboj $\rho(x_1, x_2, x_3)$ je přes šířku disku konstantní ($z = 0$). Pak máme tedy náboj $\rho(x_1, x_2)$ přes plochu Γ , jehož potenciální energii spočítáme jako

$$W(\rho(x)) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \frac{\rho(x) \rho(y)}{\sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2}} dS(y) dS(x),$$

kterou si zjednodušíme podle předchozí kapitoly 5.1 na malá mezikruží T_i . Předpokládáme tedy, že pro $\forall x \in T_i$ platí rozložení náboje $\rho(x) = \rho_i$. Jelikož pracujeme s kruhem, použijeme substituci do polárních souřadnic

$$\text{Sub 1: } x = r \cdot \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix}, \quad \text{Sub 2: } y = \tau \cdot \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix},$$

a jejich Jacobiány nabývají tvaru

$$dS(x) = r \, dr \, d\varphi, \quad dS(y) = \tau \, d\tau \, d\theta.$$

Když tyto souřadnice a jejich Jacobiány dosadíme do (2.5), získáme vztah pro výpočet potenciální energie elektrického pole na disku

$$W(\bar{\rho}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{r_i}^{r_i+h} \int_0^{2\pi} \int_{r_j}^{r_j+h} \frac{\rho_i \cdot \rho_j \cdot r \cdot \tau}{\sqrt{(r \cdot \cos \varphi - \tau \cdot \cos \theta)^2 + (r \cdot \sin \varphi - \tau \cdot \sin \theta)^2}} d\tau d\theta dr d\varphi,$$

kde $r_i, r_j, i, j = 1, 2, \dots, n$ jsou poloměry mezikruží. Zjednodušíme jmenovatele

$$\sqrt{r^2(\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) + \tau^2(\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) - 2r\tau(\cos \varphi \cos \theta + \sin \varphi \sin \theta)} = \sqrt{r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cdot \cos(\varphi - \theta)}.$$

Vidíme, že ve jmenovateli máme výraz $\cos(\varphi - \theta)$. Jelikož nám záleží na rozdílu těchto úhlů a ne na úhlech samotných, určíme substituci

$$\text{Sub} : \alpha = \varphi - \theta$$

$$d\alpha = -d\theta, \alpha \in \langle \varphi, \varphi - 2\pi \rangle.$$

Konečný tvar výpočtu potenciální energie můžeme zapsat takto:

$$W(\bar{\rho}) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{r_i}^{r_i+h} \int_{\varphi}^{\varphi-2\pi} \int_{r_j}^{r_j+h} \frac{\rho_i \cdot \rho_j \cdot r \cdot \tau}{\sqrt{r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cdot \cos \alpha}} d\tau d\alpha dr d\varphi. \quad (5.8)$$

Jelikož minimalizujeme kvadratickou formu, umíme vzorec vyřešit maticově. Vektor \bar{b} , viz (5.6), bude obsah jednotlivých mezikruží a matici \mathbb{V} vypočteme jako

$$\mathbb{V}_{ij} = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{\varphi}^{\varphi-2\pi} \int_{r_i}^{r_i+h} \int_{r_j}^{r_j+h} \frac{\rho_i \cdot \rho_j \cdot r \cdot \tau}{\sqrt{r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cdot \cos \alpha}} d\tau dr d\alpha d\varphi.$$

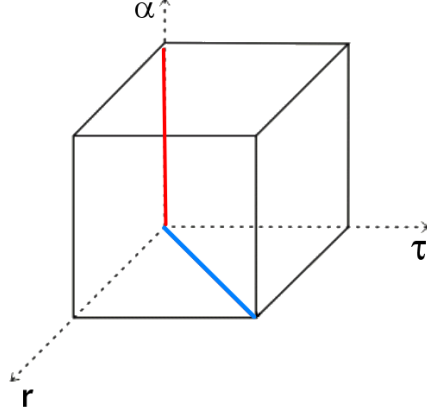
Funkce $\cos \alpha$ je 2π -periodická, tudíž můžeme posunout meze α . Navíc integrál na úhlu φ nezávisí, což nám dává

$$\mathbb{V}_{ij} = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{\pi}^{-\pi} \int_{r_i}^{r_i+h} \int_{r_j}^{r_j+h} \frac{\rho_i \cdot \rho_j \cdot r \cdot \tau}{\sqrt{r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cdot \cos \alpha}} d\tau dr d\alpha d\varphi.$$

Jelikož můžeme vyřešit první integrál, který nezávisí na φ a $\cos \alpha$ je sudá funkce, jejíž argument nabývá hodnoty v intervalu $\langle 0, \pi \rangle$, dostáváme integrál

$$\mathbb{V}_{ij} = \frac{2\pi}{4\pi} \cdot 2 \int_0^{\pi} \int_{r_i}^{r_i+h} \int_{r_j}^{r_j+h} \frac{r \cdot \tau}{\sqrt{r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cdot \cos \alpha}} dr d\tau d\alpha =$$

$$\mathbb{V}_{ij} = \int_0^\pi \int_{r_i}^{r_i+h} \int_{r_j}^{r_j+h} \frac{r \cdot \tau}{\sqrt{r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cdot \cos \alpha}} dr d\tau d\alpha. \quad (5.9)$$



Obrázek 5.1: Singularita v matici \mathbb{V}_{ij} .

Dostali jsme již integrál, který lze spočítat numerickou kvadraturou. Můžeme použít Newton-Cotesovy vzorce, ale budou konvergovat pomalu. Proto je vhodnější po odstranění singularit použít Gaussovu kvadraturu. Pokud budeme zvyšovat řád kvadratury N , získáme přesnější výsledek aproximace. Integrál, který počítáme, je však nevlastní a obsahuje singularitu ve jmenovateli. Vezměme tedy jmenovatele $r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cos \alpha$, kde $\cos \alpha \in \langle -1, 1 \rangle$ a $\alpha \in \langle 0, \pi \rangle$:

$$(r, \tau) \begin{bmatrix} 1, & -\cos \alpha \\ -\cos \alpha, & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} r \\ \tau \end{pmatrix} = 0$$

Vezměme dva případy nulového jmenovatele, když $\cos \alpha = 0$ nebo $\cos \alpha \neq 0$. Pro první případ platí:

$$\begin{bmatrix} 1, & -\cos \alpha \\ -\cos \alpha, & 1 \end{bmatrix} r_2 = \cos \alpha \cdot r_1 + r_2 \sim \begin{bmatrix} 1, & -\cos \alpha \\ 0, & 1 - \cos^2 \alpha \end{bmatrix} s_2 = \cos \alpha \cdot s_1 + s_2 \sim$$

$$\begin{bmatrix} 1, & 0 \\ 0, & 1 - \cos^2 \alpha \end{bmatrix}.$$

Jedná se o pozitivně definitní matici a jmenovatel je tedy nulový v případě, kdy $\alpha \in (0, \pi)$. Matice je ale pozitivně semidefinitní pro případ kdy $\alpha = \pi$. To poté ovšem odpovídá rovnici

$$r^2 + \tau^2 \pm 2r\tau = (r \pm \tau)^2.$$

Ale případ $(r + \tau)^2 = 0$ pro $r, \tau \geq 0$ je dán opět $r = \tau = 0$. Tudíž zbývá singularita $r = \tau$, $\alpha = 0$. Tuto singularitu, viz. modrá úsečka na obrázku 5.1, jsem v práci nestihla ošetřit. Následující text se bude věnovat pouze singularitě $r = \tau = 0$. Tu lze pozorovat červeně a vyznačenou na obrázku 5.1. Než tedy budeme počítat dále, musíme si rozdělit výpočet na tři části:

1. $|i - j| \geq 2$,
2. $|i - j| = 1$,
3. $i = j$.

5.2.1 Integrace mimodiagonálních prvků

Začneme s nejjednodušším případem, ve kterém se nevyskytuje žádná singularita a jmenovatel $\sqrt{r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cos \alpha} > 0$. Tento integrál lze počítat Gauss-Legendrovou kvadraturou. Dříve než jej však vypočítáme, přetransformujme integrál pomocí $x = a + t(b - a)$. Dostaneme $\int_a^b f(x) dx = (b - a) \int_0^1 g(t) dt$, kde $g(t) = f(a + t(b - a))$. Zavedme tedy substituce pro každý integrál:

$$\text{Sub 1: } \alpha = 0 + (\pi - 0) \cdot x_1 = \pi \cdot x_1, \quad d\alpha = \pi \cdot dx_1,$$

$$\text{Sub 2: } r = r_i + (r_i + h - r_i) \cdot x_2 = r_i + h \cdot x_2, \quad dr = h \cdot dx_2,$$

$$\text{Sub 3: } r = r_j + (r_j + h - r_j) \cdot x_3 = r_j + h \cdot x_3, \quad dr = h \cdot dx_3.$$

Pak dostáváme integrál přes referenční krychli ze vzorce (5.9):

$$\mathbb{V}_{ij} = \pi \cdot h^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \frac{(r_i + hx_2)(r_j + hx_3)}{\sqrt{(r_i + hx_2)^2 + (r_j + hx_3)^2 - 2(r_i + hx_2)(r_j + hx_3)(\cos(\pi x_1))}} dx_1 dx_2 dx_3, \quad (5.10)$$

kterou spočítáme Gauss-Legendrovou kvadraturou.

5.2.2 Integrace vedlejších diagonálních prvků

V tomto integrálu se již bude nacházet singularita ve jmenovateli naší funkce. Budeme řešit dva případy této singularity: $i = j + 1$ a $j = i + 1$. Jelikož se však jedná o symetrickou pozitivně definitní matici, stačí vyřešit pouze jeden z případů, protože druhý bude obsahovat stejné řešení.

Vezměme tedy matici (5.9) a upravme ji do tvaru, kdy $j = i + 1$:

$$\mathbb{V}_{ij} = \int_0^\pi \int_{r_i}^{r_i+h} \int_{r_{i-h}}^{r_i} \frac{r \cdot \tau}{\sqrt{r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cos \alpha}} d\tau dr d\alpha. \quad (5.11)$$

Jelikož se již jedná o integrál obsahující singularity, je nezbytné je odstranit. Případy, ve kterých je jmenovatel $r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cos \alpha$ nulový, jsme si odvodili v kapitole 5.2. Zabývejme se pouze případem $r = \tau = 0$. Dříve než však začneme řešit tyto singularity, přetřansformujme vzorec (5.11). Pomocí lineární transformace převedeme stejně jako v minulé kapitole integrál na jednotkovou krychli. Použijeme tedy substituce

$$\text{Sub 1: } \alpha = 0 + (\pi - 0) \cdot \hat{\alpha} = \pi \cdot \hat{\alpha}, \quad d\alpha = \pi \cdot d\hat{\alpha},$$

$$\text{Sub 2: } r = r_i + (r_i + h - r_i) \cdot \hat{r} = r_i + h \cdot \hat{r}, \quad dr = h \cdot d\hat{r},$$

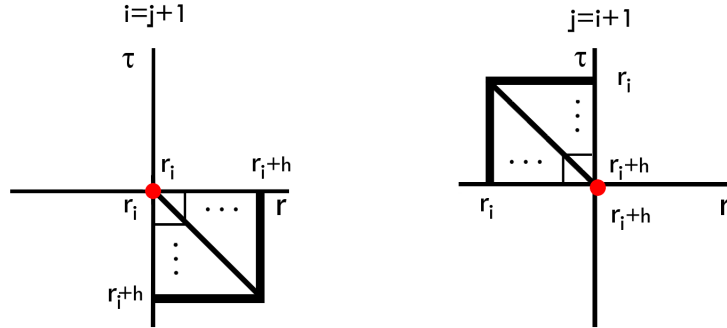
$$\text{Sub 3: } \tau = r_i + (r_i - h - r_i) \cdot \hat{\tau} = r_i - h \cdot \hat{\tau}, \quad d\tau = -h \cdot d\hat{\tau}.$$

a dostáváme

$$\mathbb{V}_{ij} = \pi \cdot h^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \frac{(r_i + h\hat{r})(r_i - h\hat{\tau})}{\sqrt{(r_i + h\hat{r})^2 + (r_i - h\hat{\tau})^2 - 2(r_i + h\hat{r})(r_i - h\hat{\tau})(\cos(\pi\hat{\alpha}))}} d\hat{\tau} d\hat{r} d\hat{\alpha} := F(\hat{\tau}, \hat{r}, \hat{\alpha}), \quad (5.12)$$

který má singularity pro $\hat{\tau} = \hat{r} = \hat{\alpha} = 0$. Upravme jmenovatele do tvaru $(r - \tau)^2 - 2r\tau(\cos \alpha - 1)$. Získáme tak integrál

$$\mathbb{V}_{ij} = \pi \cdot h^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \underbrace{\frac{(r_i + h\hat{r})(r_i - h\hat{\tau})}{\sqrt{((r_i + h\hat{r}) - (r_i - h\hat{\tau}))^2 + 2(r_i + h\hat{r})(r_i - h\hat{\tau})(1 - \cos(\pi\hat{\alpha}))}}}_{=:F} d\hat{r} d\hat{\tau} d\hat{\alpha}.$$



Obrázek 5.2: Singularity v rohu u prvků vedlejší diagonály.

Nyní již máme připravený integrál na Duffyho substituci popsanou v kapitole 4.5.1. Singularity

jsou vyznačeny na obrázku 5.2. Rozdělíme si integrál na tři pyramidy

$$\mathbb{V}_{ij} = \left\{ \int_0^1 \int_0^{\hat{\alpha}} \int_0^{\hat{\alpha}} F(\hat{\tau}, \hat{r}, \hat{\alpha}) d\hat{\tau} d\hat{r} d\hat{\alpha} + \int_0^1 \int_0^{\hat{r}} \int_0^{\hat{r}} F(\hat{\tau}, \hat{r}, \hat{\alpha}) d\hat{\tau} d\hat{\alpha} d\hat{r} + \int_0^1 \int_0^{\hat{\tau}} \int_0^{\hat{\tau}} F(\hat{\tau}, \hat{r}, \hat{\alpha}) d\hat{r} d\hat{\alpha} d\hat{\tau} \right\}$$

a na každou pyramidu použijeme zvlášť Duffyho transformaci. Pro první integrál bude

$$\text{Sub Duffy1: } \hat{\tau} = \hat{\alpha} \cdot \xi, \quad \hat{r} = \hat{\alpha} \cdot \eta,$$

pro další použijeme

$$\text{Sub Duffy2: } \hat{\alpha} = \hat{r} \cdot \xi, \quad \hat{\tau} = \hat{r} \cdot \eta$$

a poslední

$$\text{Sub Duffy3: } \hat{r} = \hat{\tau} \cdot \xi, \quad \hat{\alpha} = \hat{\tau} \cdot \eta.$$

Konečný integrál s odstraněnými singularitami tedy dostáváme ve tvaru:

$$\mathbb{V}_{ij} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \hat{\alpha}^2 F(\hat{\alpha}\xi, \hat{\alpha}\eta, \hat{\alpha}) d\xi d\eta d\hat{\alpha} + \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \hat{r}^2 F(\hat{r}\eta, \hat{r}, \hat{r}\xi) d\eta d\xi d\hat{r} + \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \hat{\tau}^2 F(\hat{\tau}, \hat{\tau}\xi, \hat{\tau}\eta) d\xi d\eta d\hat{\tau}, \quad (5.13)$$

kde funkci $F(\hat{\tau}, \hat{r}, \hat{\alpha})$ spočítáme ze vzorce (5.12). Zde je nutné ještě ověřit, zda-li je funkce F analytická. Sjednotíme proměnné ve funkci $F(\hat{\tau}, \hat{r}, \hat{\alpha})$ pomocí proměnné ν :

$$\int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \nu^2 \{F(\nu\xi, \nu\eta, \nu) + F(\nu\eta, \nu, \nu\xi) + F(\nu, \nu\xi, \nu\eta)\} d\xi d\eta d\nu.$$

Pro jednoduchost uvedeme analytické odvození funkce $F(\nu\xi, \nu\eta, \nu)$, další odvození pro funkce $\int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \nu^2 F(\nu\eta, \nu, \nu\xi) d\xi d\eta d\nu$ a $\int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \nu^2 F(\nu, \nu\xi, \nu\eta) d\xi d\eta d\nu$ jsou analogická. Dosadíme ν do funkce

$$F(\nu\xi, \nu\eta, \nu) = \frac{(r_i + h\nu\xi)(r_i - h\nu\eta)}{\sqrt{h^2(\nu\xi + \nu\eta)^2 + 2(r_i + h\nu\xi)(r_i - h\nu\eta)(1 - \cos(\pi\nu))}}.$$

$1 - \cos(\pi\nu)$ vyřešíme z Taylorova rozvoje funkce \cos :

$$1 - \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{(\pi\nu)^{2j}}{(2j)!}.$$

Rozepíšme postupně tento rozvoj jako

$$1 - \cos(\pi\nu) = 1 - 1 - \pi^2 \nu^2 \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \frac{(\pi\nu)^{2(j-1)}}{(2j)!} = \nu^2 \sum_{j=1}^{\infty} -\pi^2 (-1)^j \frac{(\pi\nu)^{2(j-1)}}{(2j)!},$$

kde $\sum_{j=1}^{\infty} -\pi^2(-1)^j \frac{(\pi\nu)^{2(j-1)}}{(2j)!}$ je nějaká analytická funkce, která je rovna funkci

$$\frac{1 - \cos(\pi\nu)}{\nu^2}.$$

Tato řada je konvergentní pro všechna $\nu \in \langle 0, 1 \rangle$. Jedná se o funkci $\frac{1 - \cos(\pi\nu)}{\nu^2}$, která by měla být analytická. Poté vložíme rozvoj do funkce F a zapíšeme jako

$$\nu^2 F(\nu\xi, \nu\eta, \nu) = \frac{\nu^2}{\nu} \frac{(r_i + h\nu\xi)(r_i - h\nu\eta)}{\sqrt{h^2(\xi + \eta)^2 + 2(r_i + h\nu\xi)(r_i - h\nu\eta)\frac{1 - \cos(\pi\nu)}{\nu^2}}}. \quad (5.14)$$

Lze si také povšimnout, že pokud $\xi = 0$ a $\eta = 0$ neobsahuje již žádnou singularitu a součin $(r_i + h\nu\xi)(r_i - h\nu\eta) < 0 \Rightarrow \xi + \eta > 0$ je také bez singularity. Konečný tvar funkce bude vypadat

$$\pi h^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \nu \frac{(r_i + h\nu\xi)(r_i - h\nu\eta)}{\sqrt{h^2(\xi + \eta)^2 + 2(r_i + h\nu\xi)(r_i - h\nu\eta)\frac{1 - \cos(\pi\nu)}{\nu^2}}} d\xi d\eta d\nu.$$

Integrály (5.13) vyřešíme trojnásobným tenzorovým součinem Gauss-Legendrovy kvadratury.

5.2.3 Integrace diagonálních prvků

Jako poslední již zbývá řešení diagonálních prvků. Jejich singularita se opět nachází jmenovateli funkce a nastává tehdy, pokud $r = \tau \wedge \alpha = 0$ nebo $r = \tau = 0$. Vzorec pro výpočet diagonálních prvků matice \mathbb{V} je

$$\mathbb{V}_{ii} = \int_{r_i}^{r_i+h} \int_{r_i}^{r_i+h} \int_0^\pi \frac{r \cdot \tau}{\sqrt{r^2 + \tau^2 - 2r\tau \cos \alpha}} d\alpha dr d\tau. \quad (5.15)$$

I v tomto případě se potřebujeme singularity zbavit. Proto použijeme podobný postup jako v minulém případě a převedeme pomocí substitucí funkci na jednotkovou krychli. Zvolíme substitute

$$\text{Sub 1: } \alpha = 0 + (\pi - 0) \cdot \hat{\alpha} = \pi \cdot \hat{\alpha}, \quad d\alpha = \pi \cdot d\hat{\alpha},$$

$$\text{Sub 2: } r = r_i + (r_i + h - r_i) \cdot \hat{r} = r_i + h \cdot \hat{r}, \quad dr = h \cdot d\hat{r},$$

$$\text{Sub 3: } \tau = r_i + (r_i + h - r_i) \cdot \hat{\tau} = r_i + h \cdot \hat{\tau}, \quad d\tau = h \cdot d\hat{\tau}.$$

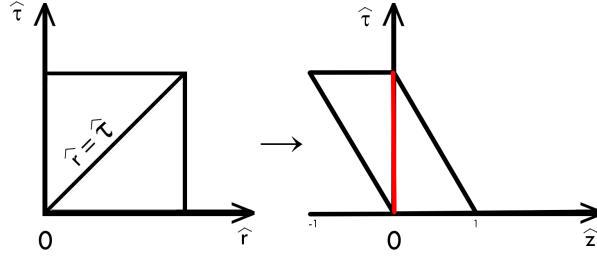
Po dosazení dostáváme integrál ve tvaru

$$\mathbb{V}_{ii} = \pi \cdot h^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \frac{(r_i + h\hat{r})(r_i + h\hat{\tau})}{\sqrt{h^2(\hat{r} - \hat{\tau})^2 + 2(r_i + h\hat{r})(r_i + h\hat{\tau})(1 - \cos(\pi\hat{\alpha}))}} d\hat{\tau} d\hat{r} d\hat{\alpha}. \quad (5.16)$$

Singularita se nám přesunula do $\hat{r} = \hat{\tau}$ a $\hat{\alpha} = 0$. Zavedme substituci

$$\text{Sub 4: } \hat{z} = \hat{r} - \hat{\tau}, \quad d\hat{z} = d\hat{r},$$

přičemž $\hat{r} = \hat{z} + \hat{\tau}$. Změnu iterační oblasti a singularity lze pozorovat na obrázku 5.3.



Obrázek 5.3: Přenesená singularita z rohu pomocí substituce.

Dostáváme nový integrál

$$\mathbb{V}_{ii} = \pi \cdot h^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_{-\hat{\tau}}^{1-\hat{\tau}} \frac{(r_i + h(\hat{z} + \hat{\tau}))(r_i + h\hat{\tau})}{\sqrt{h^2(\hat{z} + \hat{\tau} - \hat{\tau})^2 + 2(r_i + h(\hat{z} + \hat{\tau}))(r_i + h\hat{\tau})(1 - \cos(\pi\hat{\alpha}))}} d\hat{z} d\hat{\tau} d\hat{\alpha}.$$

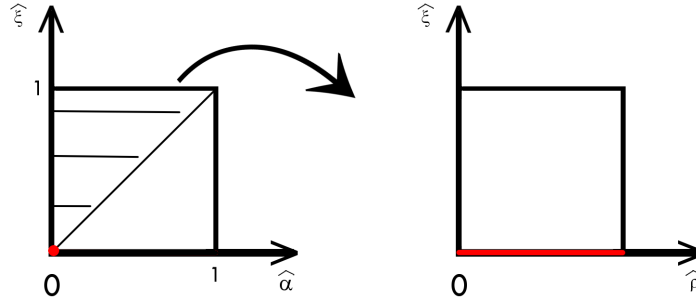
Rozdělme si integrál $\int_{-\hat{\tau}}^{1-\hat{\tau}}$ na dva integrály $\int_{-\hat{\tau}}^0$ a $\int_0^{1-\hat{\tau}}$. Jelikož máme díky substituce nové meze, převedeme tento integrál znovu na referenční krychli a nahradíme proměnné za

$$\text{Sub 5: } \hat{z} = -\hat{\tau}\hat{\xi}, \quad d\hat{z} = -\hat{\tau}d\hat{\xi},$$

$$\text{Sub 6: } \hat{z} = (1 - \hat{\tau})\hat{\eta}, \quad d\hat{z} = (1 - \hat{\tau})d\hat{\eta}.$$

Dostáváme

$$\begin{aligned} \mathbb{V}_{ii} = & \pi \cdot h^2 \int_0^1 \int_0^1 \hat{\tau} \cdot \int_0^1 \underbrace{\frac{(r_i + h(-\hat{\tau}\hat{\xi} + \hat{\tau}))(r_i + h\hat{\tau})}{\sqrt{h^2\hat{\tau}^2\hat{\xi}^2 + 2(r_i + h(-\hat{\tau}\hat{\xi} + \hat{\tau}))(r_i + h\hat{\tau})(1 - \cos(\pi\hat{\alpha}))}}}_{=:F_1} d\hat{\xi} d\hat{\tau} d\hat{\alpha} + \\ & (1 - \hat{\tau}) \cdot \int_0^1 \underbrace{\frac{(r_i + h((1 - \hat{\tau})\hat{\eta} + \hat{\tau}))(r_i + h\hat{\tau})}{\sqrt{h^2(1 - \hat{\tau})^2\hat{\eta}^2 + 2(r_i + h((1 - \hat{\tau})\hat{\eta} + \hat{\tau}))(r_i + h\hat{\tau})(1 - \cos(\pi\hat{\alpha}))}}}_{=:F_2} d\hat{\eta} d\hat{\tau} d\hat{\alpha}. \end{aligned}$$



Obrázek 5.4: Přenesená singularita z rohu pomocí substituce pro funkci F_1 .

Ve jmenovateli funkce F_1 máme singularitu v $\hat{\xi} = \hat{\alpha} = 0$ a ve druhé funkci F_2 ji máme v $\hat{\eta} = \hat{\alpha} = 0$. Tuto singularitu již však umíme vyřešit pomocí Duffyho transformace. První část tak vyřešíme pomocí substituce

$$\text{Sub Duffy1: } \hat{\alpha} = \hat{\xi} \cdot \hat{\rho}, \quad d\hat{\alpha} = \hat{\xi} d\hat{\rho}, \quad \hat{\xi} = \hat{\omega},$$

kterou lze pozorovat na obrázku 5.4 a použijeme na funkci F_1 :

$$\int_0^1 \int_0^1 F_1(\hat{\alpha}, \hat{\xi}) d\hat{\xi} d\hat{\alpha} \stackrel{\text{Duffy}}{=} \int_0^1 \int_0^1 \hat{\omega} (F_1(\hat{\rho}\hat{\omega}, \hat{\omega}) + F_1(\hat{\omega}, \hat{\rho}\hat{\omega})) d\hat{\rho} d\hat{\omega}.$$

Stejně uvedme substituci pro F_2 jako

$$\text{Sub Duffy2: } \hat{\xi} = \hat{\alpha} \cdot \hat{\rho}, \quad d\hat{\xi} = \hat{\alpha} d\hat{\rho}, \quad \hat{\alpha} = \hat{\omega}$$

a tu lze pozorovat na obrázku 5.5. Dosaďme do funkce F_2 :

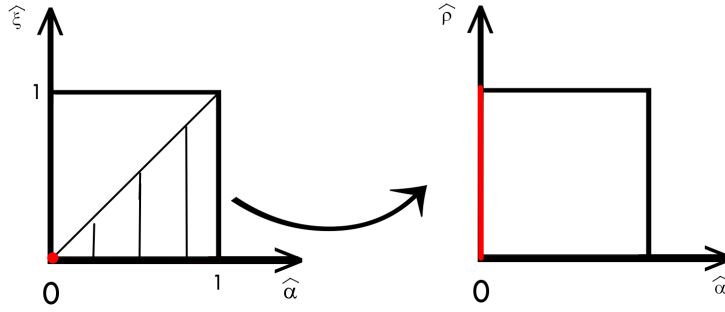
$$\int_0^1 \int_0^1 F_2(\hat{\alpha}, \hat{\eta}) d\hat{\eta} d\hat{\alpha} \stackrel{\text{Duffy}}{=} \int_0^1 \int_0^1 \hat{\omega} (F_2(\hat{\rho}\hat{\omega}, \hat{\omega}) + F_2(\hat{\omega}, \hat{\rho}\hat{\omega})) d\hat{\rho} d\hat{\omega}.$$

V tuto chvíli dostáváme čtyři integrály, které umíme sečíst do jednoho ve tvaru

$$\mathbb{V}_{ii} = \pi h^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \hat{\omega} \{ \hat{\tau} (F_1(\hat{\rho}\hat{\omega}, \hat{\omega}) + F_1(\hat{\omega}, \hat{\rho}\hat{\omega})) + (1 - \hat{\tau}) (F_2(\hat{\rho}\hat{\omega}, \hat{\omega}) + F_2(\hat{\omega}, \hat{\rho}\hat{\omega})) \} d\hat{\rho} d\hat{\tau} d\hat{\omega} \quad (5.17)$$

Obě funkce F_1, F_2 by měly být analytické a lze je efektivně spočítat Gauss-Legendrovou kvadraturou.

Po integraci všech prvků matice nám již zbývá vyřešit soustavu rovnic pro rozložení náboje na povrchu disku. V kapitole 5.1 jsme si uvedli, že soustavu lineárních rovnic vypočteme jako 5.7. Matici \mathbb{V} máme vypočtenou, náboj $Q = 1$, tudíž nám zbývá pouze vypočítat vektor \bar{b} . Víme, že



Obrázek 5.5: Přenesená singularita z rohu pomocí substituce pro funkci F_2 .

nám určuje jednotlivé obsahy plochy Γ rozdělené na n mezikruží. Tudíž vektor \bar{b} vypočteme jako

$$\bar{b}_i^T = (\pi r_i^2) - (\pi r_{i-1}^2),$$

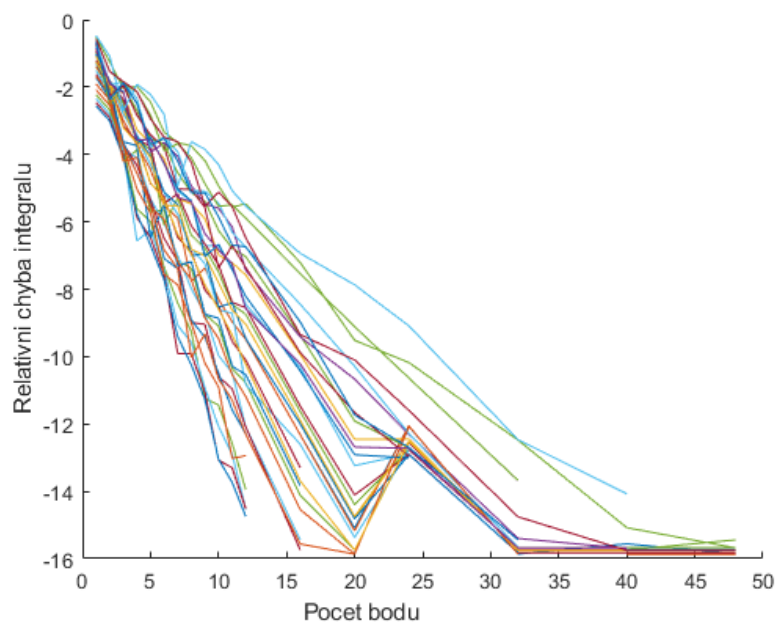
kde $r_i, i = 1, \dots, n$ je poloměr v dané části disku. V tuto chvíli nám nezbyvá nic jiného, než vyřešit soustavu rovnic kdy výsledek této rovnice bude rozložení náboje $\bar{\rho}$ a Lagrangeovský multiplikátor λ .

5.3 Numerické experimenty

V této poslední kapitole uvedeme řešení rozložení náboje pro konkrétní hodnoty a popíšeme výsledky práce. Nejprve zjistíme chybu konvergence pro prvky matice. Vykreslíme si zvlášť všechny tři případy prvků. Tyto grafy budou znázorňovat logaritmickou chybu vůči bodům v jedné dimenzi. Dále budou vykresleny grafy znázorňující rozložení elektrického náboje na povrchu disku. Všechny výsledky byly zpracovány v software Matlab.

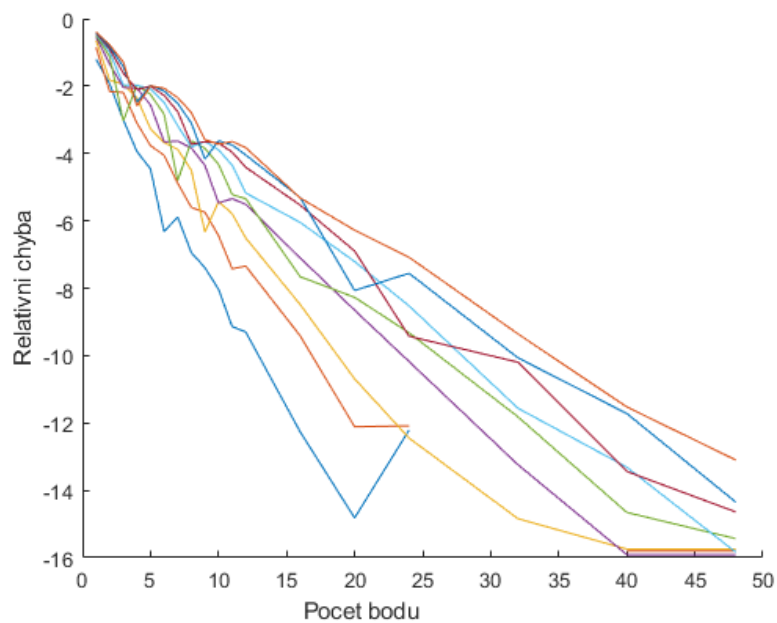
Poněvadž nelze spočítat integrály analyticky, počítáme relativní chybu vždy vůči nejpřesnějšímu pravidlu Gauss-Legendrovy kvadratury, kdy nejvyšší stupeň kvadratury je $N = 19$ odpovídající až 64 bodům v jedné dimenzi. Vezměme příklad, kdy máme poloměr $r = 1$. Ten rozdělíme na $n = 10$ dílků. Rozeberme si nejdříve případ chyby mimodiagonálních prvků zobrazených na obrázku 5.6. V tomto grafu pozorujeme, že prvky vždycky konvergují. Ze začátku mají křivky přibližně podobný spád, poté jsou některé konvergence pomalejší, ale i v tomto případě má křivka tendenci konvergovat dále. Všechny prvky mají vysokou přesnost.

Podívejme se na druhý příklad exponenciální konvergence chyby prvků vedlejší diagonály, které pozorujeme na obrázku 5.7. Vidíme, že graf se již nechová stejně, jako v minulém případě. Konvergence některých prvků jsou pomalejší a jejich přesnost již není tak vysoká. I když se zdá, že pomalá



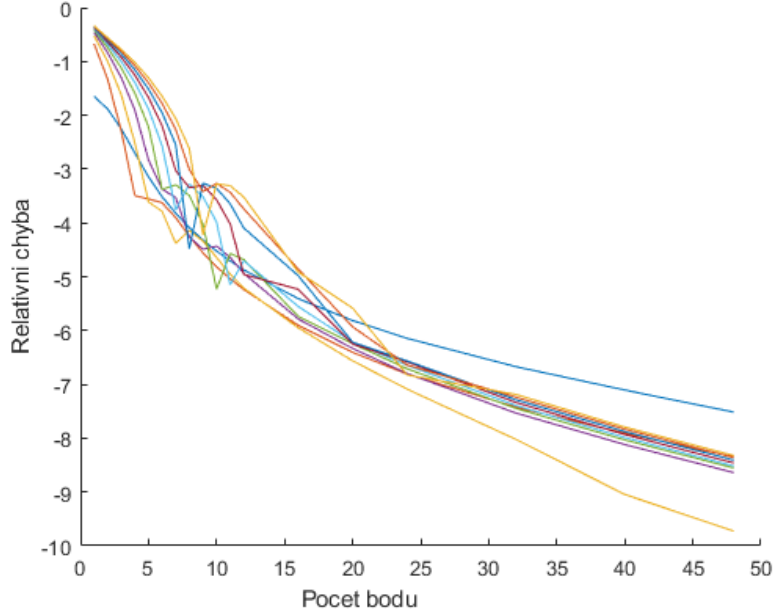
Obrázek 5.6: Chyba konvergence mimodiagonálních prvků v jedné dimenzi pro $n = 10$.

konvergence některých prvků může působit problémy, i tyto křivky mají stále sklon konvergovat k co nejpřesnější hodnotě. Není tedy nutné považovat tento jev za příliš problematický.



Obrázek 5.7: Chyba konvergence prvků vedlejší diagonály v jedné dimenzi pro $n = 10$.

V posledním případě na obrázku 5.8 se zaměříme na graf chyby diagonálních prvků. Z počátku vidíme velký sklon konvergence prvků, který však postupně zpomaluje. Poté se ztratí exponenciální konvergence. Zdá se, že toto je způsobeno faktem, že neošetřujeme singularitu $r = \tau \wedge \alpha = 0$.

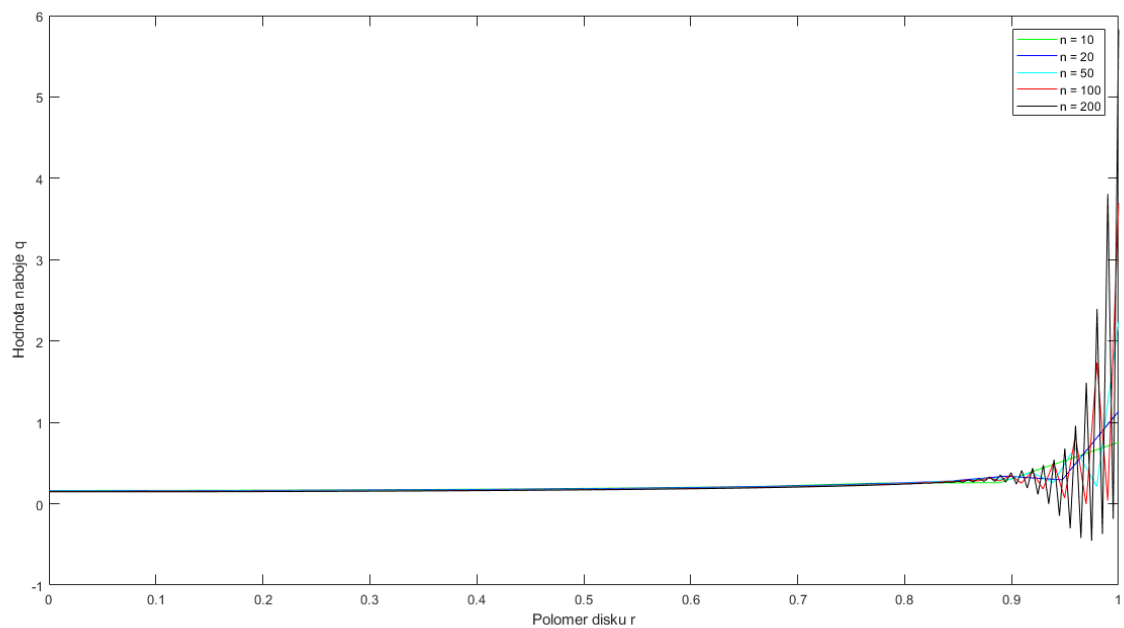


Obrázek 5.8: Chyba konvergence diagonálních prvků v jedné dimenzi pro $n = 10$.

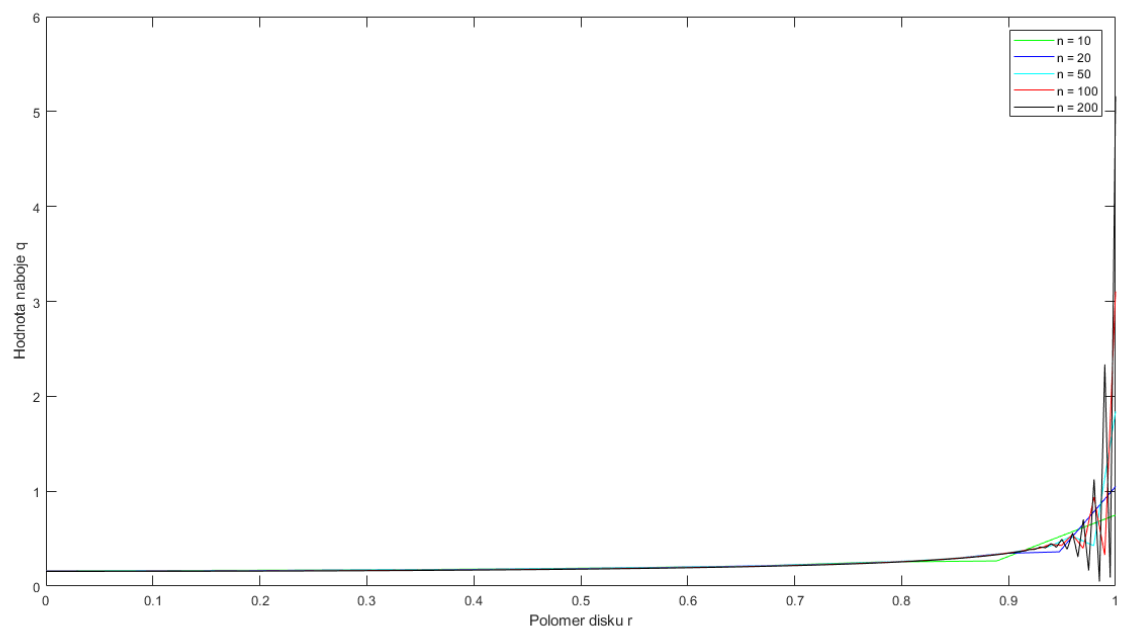
Z důvodu nedokonalé konvergence chyby budeme pozorovat při vykreslování rozložení náboje jevy, které nejsou optimální. Vždy je vyobrazeno pět křivek, které znázorňují pokaždé jiný počet bodů n . Každý graf obsahuje legendu, která tuto informaci popisuje.

Na obrázku 5.9 vidíme rozložení náboje pro kvadrurní stupeň $N = 8$. Zprvu pozorujeme, že energie elektrostatického pole postupně roste. Pokud zvolíme $n = 10$, pozorujeme, že křivka roste a na konci tělesa pozorujeme nejvyšší rozložení náboje. Další křivka $n = 20$ obsahuje na jednom bodě mírný pokles. U dalších křivek již pozorujeme oscilaci, která by neměla vzniknout. Tato oscilace je pravděpodobně důsledek pomalé konvergence diagonálních prvků. Všechny křivky ovšem mají nejvyšší koncentraci náboje právě na konci disku.

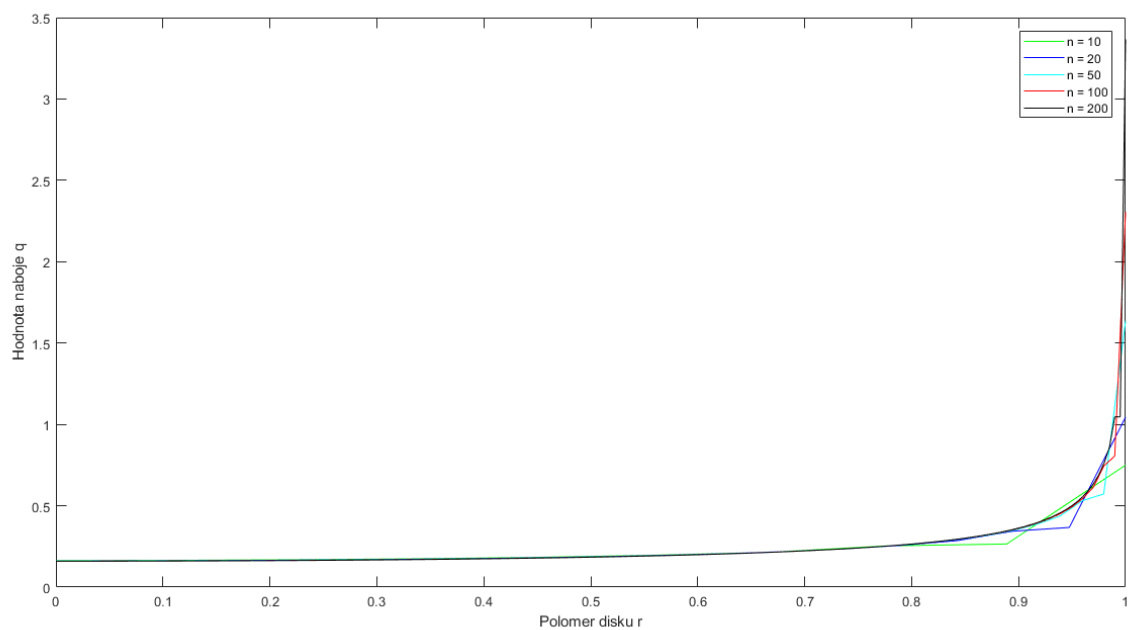
Graf na obrázku 5.10 obsahuje značně méně oscilací. Pozorujeme, že již první dvě křivky $n = 10$ a $n = 20$ postupně rostou. Náboj nejvyšší hodnoty tak mají právě na konci tělesa. Ostatní stále obsahují oscilace způsobené pravděpodobně pomalou konvergencí diagonálních prvků.



Obrázek 5.9: Rozložení náboje při použití kvadraturního stupně $N = 8$.



Obrázek 5.10: Rozložení náboje při použití kvadraturního stupně $N = 12$.



Obrázek 5.11: Rozložení náboje při použití kvadrurního stupně $N = 16$.

Z grafu na obrázku 5.11 lze pozorovat křivky bez oscilací s nejvyšším nábojem opět na konci disku. Ten se postupně zvyšuje s rostoucím poloměrem jako v minulých případech.

Kapitola 6

Závěr

V této práci jsem se zabývala rozložením elektrického náboje na povrchu tělesa. Během teoretické části práce jsem postupně v každé kapitole předložila část úlohy, kterou jsem později vypracovala. Každá kapitola má popsanou problematiku, kterou jsem ve výpočtu potřebovala a definovala jsem všechny potřebné vzorce pro vyřešení.

V praktické části byl popsán konkrétní případ na výpočet kruhového disku o konstantní výšce. Úlohu jsem diskretizovala z objemu Ω přes plochu Γ rozdělenou na malé trojúhelníky. Pomocí minimalizace kvadratické funkce jsem získala soustavu rovnic, ve které jsem potřebovala vyřešit matici V . Prvky matice byly rozděleny na tři případy: diagonální, mimodiagonální a prvky na vedlejší diagonále. Mimodiagonální prvky neobsahovaly singularitu a jejich řešení jsem dostala transformací na jednotkovou krychli a Gauss-Legendrovou kvadraturou. Prvky na vedlejší diagonále již obsahovaly singularitu ve jmenovateli, kterou jsem musela odstranit. Jednalo se o případy $r = \tau \wedge \alpha = 0$, který není v této práci ošetřen a pro budoucí výzkum je nutné tuto singularitu ošetřit, nebo $r = \tau = 0$. Pomocí Duffyho substituce jsem převedla daný integrál na tři pyramid, díky nimž se singularita odstranila a dostala jsem řešitelný integrál. Ten jsem vyřešila použitím Gauss-Legendrovy kvadratury jako u mimodiagonálních prvků. Jako poslední byly řešeny diagonální prvky obsahující singularitu ve jmenovateli. Tento integrál jsem převedla na jednotkovou krychli a znovu použitím Duffyho transformace jsem odstranila singularitu ve funkci. Výslednou funkci jsem vyřešila pomocí Gauss-Legendrovy kvadratury. Po výpočtu matice jsem spočítala jednotlivé obsahy mezikružích na disku a vypočetla soustavu rovnic, jejíž výsledek bylo řešení rozložení náboje na povrchu tenkostěnného disku.

Numerické výsledky prokazují konvergenci mimodiagonálních prvků a prvků na vedlejší diagonále. U diagonálních prvků se však nejedná o exponenciální konvergenci a pozoruji malou přesnost výsledných bodů. Příčina je nejspíše již zmiňovaná neošetřená singularita $r = \tau \wedge \alpha = 0$. Nepřesnost diagonálních prvků má nejspíše za následek oscilaci křivek u výsledných grafů rozložení náboje. Při vyšším kvadrturním stupni N je vidět menší oscilace křivek. I přes neoptimální výsledky lze usoudit, že nejvyšší koncentrace náboje na kruhovém disku se nachází na obvodu a výsledky jsou tak

v souladu s realitou. V ideálním případě bych dosáhla počítačové přesnosti, což se podařilo pouze u mimodiagonálních prvků pro velký počet kvadraturních uzlů.

Celá práce směřuje k metodě hraničních prvků, od které je odvozená. Jedná se tak o její nejjednodušší interpretaci.

Literatura

1. HOFMANN, Jaroslav; URBANOVÁ, Marie. *Fyzika I*. Praha: Vydavatelství VŠCHT, 2011. ISBN 978-80-7080-777-4. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:52948144-1546-435b-949a-8a4c6f323815>.
2. KOPAL, Antonín; KATEDRA FYZIKY. *Fyzika II: elektřina, magnetismus, Maxwellovy rovnice*. Liberec: Technická univerzita v Liberci, 2008. ISBN 978-80-7372-311-8. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:975e7670-320f-11ea-b0e3-005056827e52>.
3. MACKŮ, Bedřich. *Fyzika: Úvodní učebnice pro vysoké školy*. Praha: Jednota československých matematiků a fysiků, 1928. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:62e80930-2e76-11e4-8e0d-005056827e51>.
4. LUKÁŠ, Dalibor. *Matematické modelování elektromagnetických polí*. Ostrava: VŠB - Technická univerzita Ostrava a Západočeská univerzita v Plzni, 2011. Dostupné také z: <http://mi21.vsb.cz>.
5. KUBEN, Jaromír; MAYEROVÁ, Šárka; RAČKOVÁ, Pavlína; ŠARMANOVÁ, Petra. *Diferenciální počet funkcí více proměnných*. Ostrava, Brno: VŠB - Technická univerzita Ostrava a Západočeská univerzita v Plzni, 2012. Dostupné také z: <http://mi21.vsb.cz>.
6. BOUCHALA, Jiří. *MATEMATIKA III pro bakalářské studium*. Ostrava: Katedra aplikované matematiky, FEI VŠB-TU Ostrava, 2000. Dostupné také z: <http://www.am.vsb.cz/bouchala>.
7. BRABEC, Jiří; HRŮZA, Bohuslav. *Matematická analýza II*. Praha: SNTL-Nakladatelství technické literatury, 1986. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:3eb22b00-38d9-11e4-8e0d-005056827e51>.
8. FIALKA, Miloslav; FAKULTA APLIKOVANÉ INFORMATIKY. *Diferenciální počet funkcí více proměnných s aplikacemi: výklad, řešení, příklady, cvičení*. Zlín: Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, 2008. ISBN 978-80-7318-665-4. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:98d8f8e0-15bd-11ea-a20e-005056827e51>.

9. BAILOVÁ, Michaela. *Gaussovy kvadratury*. Ostrava, 2013. Dostupné také z: https://dspace.vsb.cz/bitstream/handle/10084/98783/BAI0012_FEI_B2647_1103R031_2013.pdf?sequence=1&isAllowed=y. Bakalářská práce.
10. KUČERA, Radek; EVROPSKÝ SOCIÁLNÍ FOND A KATEDRA MATEMATIKY A DESKRIPTIVNÍ GEOMETRIE. *Numerické metody*. Ostrava: VŠB - Technická univerzita Ostrava, 2011. ISBN 80-248-1198-7. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:2cd06820-5bea-11e7-a0ea-005056827e52>.
11. ČERMÁK, Libor; HLAVIČKA, Rudolf; FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ. *Numerické metody*. Brno: Akademické nakladatelství CERM, 2005. ISBN 80-214-3071-0. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:22a1a700-cec7-11e3-b110-005056827e51>.
12. VONDRÁK, Vít; POSPÍŠIL, Lukáš. *Numerické metody I*. Ostrava: VŠB - Technická univerzita Ostrava a Západočeská univerzita v Plzni, 2011. Dostupné také z: <http://mi21.vsb.cz>.
13. HOROVÁ, Ivana; ZELINKA, Jiří; PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA. *Numerické metody*. Brno: Masarykova univerzita v Brně, 2004. ISBN 80-210-3317-7. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:d91b9130-703c-11e6-8db5-005056827e52>.
14. RALSTON, Anthony. *Základy numerické matematiky: příručka pro univerzitu ČSR*. Praha: Academia, 1973. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:92a1e850-3716-11e4-8e0d-005056827e51>.
15. MACHAČOVÁ, Ludmila; EKONOMICKO-SPRÁVNÍ FAKULTA. *Matematika: základy diferenciálního a integrálního počtu*. Pardubice: Univerzita Pardubice, 2007. ISBN 978-80-7395-001-9. Dostupné také z: <https://ndk.cz/uuid/uuid:930f0b80-7dff-11e9-823d-005056827e52>.
16. DOSTÁL, Zdeněk; VONDRÁK, Vít. *Lineární algebra*. Ostrava: VŠB - Technická univerzita Ostrava a Západočeská univerzita v Plzni, 2012. Dostupné také z: <http://mi21.vsb.cz>.
17. BOUCHALA, Jiří; SADOWSKÁ, Marie. *MATHEMATICAL ANALYSIS I*. Ostrava: VŠB - Technická univerzita Ostrava, Fakulta elektrotechniky a informatiky, 2007. Dostupné také z: <http://www.am.vsb.cz/bouchala>.
18. MOUSAVI, S.E.; SUKUMAR, N. Generalized Gaussian quadrature rules for discontinuities and crack singularities in the extended finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2010, roč. 199, č. 49, s. 3237–3249. ISSN 0045-7825. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.06.031>.
19. DUFFY, Michael G. Quadrature Over a Pyramid or Cube of Integrands with a Singularity at a Vertex. *SIAM Journal on Numerical Analysis*. 1982, roč. 19, č. 6, s. 1260–1262. Dostupné z DOI: 10.1137/0719090.

20. MOUSAVI, S. E.; SUKUMAR, N. Generalized Duffy transformation for integrating vertex singularities. *Computational Mechanics*. 2010-01, roč. 45, s. 127–140. Dostupné z DOI: 10 . 1007/s00466-009-0424-1.